

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	NIR-Fluoreszenzfarbstoffe	1
1.1.1	Grundlagen und Anwendungsgebiete	1
1.1.2	Photophysikalische Grundlagen	3
1.1.3	NIR-Farbstoffklassen	6
1.2	Diketopyrrolopyrrole (DPP)	8
1.2.1	Geschichte der DPP-Farbstoffe	8
1.2.2	DPP Synthesen	10
1.2.3	Chemische Eigenschaften	12
1.3	Borkomplexfarbstoffe	14
1.3.1	Geschichte der Borkomplexfarbstoffe	14
1.3.2	Bodipy-Farbstoffe	15
1.3.3	Diheteroarylcyankomplexe	17
1.4	Pyrrolopyrrol-Cyanine	18
1.5	Aufgabenstellung	20
2	Ergebnisse und Diskussion	23
2.1	Gliederung des Diskussionsteils	23
2.2	Diketopyrrolopyrrole (DPP)	24
2.2.1	Verwendete DPPs	24
2.2.2	Synthese der DPP-Bausteine	25
2.3	Heteroarylacetonitrile (HAA)	30
2.3.1	HAA Synthesestrategien	30
2.3.2	Synthesen nach Methode A	31
2.3.3	Synthesen nach Methode B	33
2.3.4	Synthesen nach Methode C	34
2.4	Komplexierungsreagenzien	35
2.5	Symmetrische Pyrrolopyrrol-Cyanine (PPCy)	37
2.5.1	Synthese der PPCys	37
2.5.2	Struktur und Eigenschaften der PPCys	41

2.6	Ketopyrrolopyrrole (KPP)	59
2.6.1	Synthese der KPPs	59
2.6.2	Struktur und Eigenschaften der KPPs	61
2.7	Asymmetrische Pyrrolopyrrol-Cyanine	64
2.7.1	Synthese der asymmetrischen PPCys	64
2.7.2	Struktur und Eigenschaften der asymmetrischen PPCys	66
2.7.3	Anwendung der asymmetrischen PPCys	68
2.8	Bis-Pyrrolopyrrol-Cyanine (Bis-PPCy)	70
2.8.1	Synthese der Bis-PPCys	70
2.8.2	Struktur und Eigenschaften der Bis-PPCys	72
2.9	Aza-Pyrrolopyrrol-Cyanine (Aza-PPCy)	79
2.9.1	Synthese der Aza-PPCys	79
2.9.2	Struktur und Eigenschaften der Aza-PPCys	82
2.10	Anwendungen von PPCy-Farbstoffen	88
2.10.1	Fluoreszenz- und Fluoreszenzlebenszeit-Bildgebung <i>in vivo</i>	88
2.10.2	Verwendung von PPCys als Fluoreszenzmarker	91
2.10.3	Einzelnmolekülspektroskopie	95
3	Zusammenfassung	101
4	Ausblick	105
5	Experimenteller Teil	109
5.1	Allgemeiner Teil	109
5.1.1	Präparatives Arbeiten	109
5.1.2	Spektroskopische und analytische Methoden	109
5.2	Diketopyrrolopyrrole	112
5.2.1	4-Octyloxy-DPP (37)	112
5.2.2	3,4,5-Tributoxy-DPP (38)	113
5.2.3	3,4,5-Tridodecyloxy-DPP (39)	116
5.2.4	4-(4-Hydroxy-butoxy)-DPP (41)	118
5.2.5	4-(3-(Dimethylamino)propoxy)-DPP (42)	120
5.2.6	4-Dimethylamino-DPP (43)	121
5.3	Heteroarylacetonitrile	122
5.3.1	2-(6- <i>tert</i> -Butylchinolin-2-yl)-acetonitril (57)	122
5.3.2	(6-Bromchinolin-2-yl)-acetonitril (58)	124
5.3.3	5-(2-(Cyanomethyl)chinolin-6-yl)-4-pentinsäure- <i>tert</i> -butylester (60)	126
5.3.4	(6-Methoxybenzothiazol-2-yl)-acetonitril (61)	127

5.3.5	2,6-Dicyanomethylbenzo[1,2-d:4,5-d']bisthiazol (62)	128
5.3.6	(5- <i>tert</i> -Butylbenzooxazol-2-yl)-acetonitril (63)	129
5.3.7	(Naphtho[2,3-d]oxazol-2-yl)-acetonitril (64)	130
5.3.8	(5-Aminobenzooxazol-2-yl)-acetonitril (66)	130
5.3.9	(4,6-Dimethylpyridin-2-yl)-acetonitril (67)	131
5.3.10	Chinoxalin-2-yl-acetonitril (69)	132
5.4	Komplexierungsreagenzien	134
5.4.1	Chlorodiphenylboran (93)	134
5.5	H-Pyrrolopyrrol-Cyanine (H-PPCys)	135
5.5.1	Symmetrische H-PPCys	135
5.5.2	H-Ketopyrrolopyrrole (H-KPPs)	144
5.5.3	Asymmetrische H-PPCys	149
5.5.4	Bis-H-PPCys	154
5.6	BF ₂ -Pyrrolopyrrol-Cyanine (BF ₂ -PPCys)	159
5.6.1	Symmetrische BF ₂ -PPCys	159
5.6.2	BF ₂ -KPPs	168
5.6.3	Asymmetrische BF ₂ -PPCys	169
5.6.4	Bis-BF ₂ -PPCys	175
5.7	BPh ₂ -Pyrrolopyrrol-Cyanine (BPh ₂ -PPCys)	179
5.7.1	Symmetrische BPh ₂ -PPCys	179
5.7.2	Asymmetrische BPh ₂ -PPCys	186
5.7.3	Bis-BPh ₂ -PPCys	187
5.8	Aza-PPCys	191
5.8.1	Aza-H-KPPs	191
5.8.2	Aza-H-PPCys	194
5.8.3	Aza-BF ₂ -PPCys	197
5.8.4	Aza-BPh ₂ -PPCys	199
Abkürzungsverzeichnis		201
Literaturverzeichnis		203
6	Anhang	213
6.1	Kristallstrukturdaten für CCDC 703296 (119)	213
6.2	Strukturformeln	216